



# Simulation of Strain-Induced Grain Boundary Migration via Coupling Phase-Field and Crystal Plasticity Methods: Effect of Representative Volume Element Size

Mohammad Shadpour<sup>1</sup>, Mohammad Jafari<sup>1\*</sup> and Mostafa Jamshidian<sup>2</sup>

1. Department of Mechanical Engineering, Yazd University, Yazd, Iran

2. School of Engineering, The University of Western Australia, Crawley, WA 6009, Australia

**Abstract:** Multiscale modeling of microstructural evolution in polycrystalline metals is commonly conducted based on the concept of a representative volume element (RVE), which characterizes the response of a material point. In this study, a coupled phase field and dislocation density-based crystal plasticity framework is used to investigate the effect of RVE size on the kinetics of static strain-induced grain boundary migration. The finite element-based crystal plasticity model is employed to compute the stored deformation energy distribution within individual grains, while the phase field model describes the subsequent grain boundary migration during high-temperature annealing. The simulations of grain growth are performed for a polycrystalline aluminum with elastic cubic symmetry under plastic uniaxial loading. The RVE size is varied in the range from 10 to 60 $\mu\text{m}$  for simulations of static strain-induced grain boundary migration. The initial average grain diameter for all RVEs is 3  $\mu\text{m}$ . The periodic boundary condition is applied to statistical RVEs with sufficient scale separation between the microstructure and macrostructure. To determine the optimum RVE size under a specific boundary condition, a convergence analysis is performed by plotting the grain growth component as a function of RVE size. The simulation results indicate that an RVE size of 30  $\mu\text{m}$  statistically provides a representative response for tensile loading conditions. The outcomes of this work provide valuable insights for determining the optimum RVE size and for the design of thermomechanical processing strategies in metallic materials.

**Keywords:** Strain-induced grain boundary migration (SIBM), Crystal plasticity, Dislocation density, Phase-field method, RVE size effect.

Received: Mar. 11, 2026; Revised: May 11, 2026; Accepted: May 16, 2026; Published Online: Jun. 20, 2026.

\* Corresponding Author: [m.jafari@yazd.ac.ir](mailto:m.jafari@yazd.ac.ir)

How to Cite: Shadpour Mohammad, Jafari Mohammad, Jamshidian Mostafa, Simulation of Strain-Induced Grain Boundary Migration via Coupling Phase Field and Crystal Plasticity Methods: Effect of Representative Volume Element Size, Journal of Computational Methods in Engineering; 2026, 45(1), 119-137; doi. 10.47176/jcme.45.1.1080.





## مقاله پژوهشی

## شبیه‌سازی حرکت مرزدانه متأثر از کرنش با کوپل میدان‌فاز- کریستال پلاستیسیته:

## اثر اندازه المان حجمک نماینده

محمد شادپور<sup>۱</sup>، محمد جعفری گلوک<sup>۱\*</sup> و مصطفی جمشیدیان<sup>۲</sup>

۱. دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

۲. دانشکده مهندسی، دانشگاه استرالیای غربی، کراولی، استرالیا

**چکیده** - مدل‌سازی چندمقیاسی<sup>۱</sup> رشد میکروساختار<sup>۲</sup> در فلزات چندبلوری<sup>۳</sup>، معمولاً بر پایه مفهوم المان حجمک نماینده<sup>۴</sup> صورت می‌گیرد. این مفهوم، رفتار یک نقطه مادی<sup>۵</sup> را در مقیاس ماکروسکوپی<sup>۶</sup> نمایش می‌دهد. در این پژوهش، با استفاده از روش کوپل‌شده<sup>۷</sup> میدان‌فاز<sup>۸</sup> و کریستال پلاستیسیته<sup>۹</sup> بر مبنای چگالی نابجایی<sup>۱۰</sup>، تأثیر اندازه‌ی المان حجمک نماینده بر سینتیک حرکت مرزدانه ناشی از کرنش<sup>۱۱</sup> پلاستیک در فلز آلومینیوم بررسی می‌شود. مدل کریستال پلاستیسیته<sup>۱۲</sup> بر مبنای چگالی نابجایی برای محاسبه‌ی توزیع انرژی تغییرشکل ذخیره‌شده<sup>۱۳</sup> در هر دانه<sup>۱۴</sup> و مدل میدان‌فاز برای توصیف حرکت مرزدانه‌ها در طی فرآیند عملیات حرارتی<sup>۱۵</sup> به‌کار گرفته می‌شود. اندازه المان حجمک نماینده در محدوده ۱۰ تا ۶۰ میکرومتر تغییر می‌کند و میانگین قطر اولیه دانه‌ها برای همه المان‌های حجمک نماینده سه میکرومتر و شرایط مرزی تکرار شونده در نظر گرفته می‌شود. برای تعیین اندازه بهینه المان حجمک نماینده، تحلیل همگرایی با رسم نمودار پارامترهای میکروساختار به صورت تابعی از زمان عملیات حرارتی برای اندازه‌های مختلف المان حجمک نماینده انجام می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که از نظر آماری، اندازه المان حجمک نماینده ۳۰ میکرومتر و بیشتر برای توصیف رفتار ماده در شرایط بارگذاری کششی مناسب است. این نتایج می‌تواند برای انتخاب ابعاد بهینه‌ی المان حجمک نماینده و طراحی فرآیندهای ترمومکانیکی<sup>۱۶</sup> در مهندسی مواد، مورد استفاده قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: حرکت مرزدانه متأثر از کرنش، کریستال پلاستیسیته، چگالی نابجایی، میدان‌فاز، اندازه المان حجمک نماینده

دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۱۲/۲۰، بازنگری: ۱۴۰۵/۰۲/۲۱، پذیرش: ۱۴۰۵/۰۲/۲۶، اولین انتشار: ۱۴۰۵/۰۳/۳۰

\* نویسنده مسئول، رایانامه: [m.jafari@yazd.ac.ir](mailto:m.jafari@yazd.ac.ir)

## فهرست علائم

نام	علائم	نام	علائم
مدول تجمع نابجایی ( $m^{-1}$ )	$K_1$	انرژی آزاد ( $J/m^3$ )	$\psi$
مدول بازیابی	$K_2$	انرژی آزاد گرمایی ( $J/m^3$ )	$\psi^\theta$
ضریب کاهش نابجایی پشت مرز	$C_d$	انرژی آزاد ترمو-الاستیک ( $J/m^3$ )	$\psi^e$
متغیر میدان فاز	$\xi$	انرژی آزاد پلاستیک ( $J/m^3$ )	$\psi^p$
نرخ کرنش برشی مرجع ( $s^{-1}$ )	$\dot{\gamma}_\alpha$	ظرفیت حرارتی ویژه ( $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ )	$c_{th}$
تانسور تنش کوشی (Pa)	$T$	دما (K)	$\theta$
بردار میکروتنش (Pa)	$h$	دمای مرجع (K)	$\theta_0$
تانسور اشمید	$S_{i,0}^\alpha$	کرنش الاستیک	$E^e$
تنش برشی (Pa)	$\tau_\alpha$	ضریب انبساط حرارتی ( $K^{-1}$ )	$\alpha_{th}$
ضریب حساسیت نرخ برشی	$m$	تانسور سفتی الاستیک (Pa)	$C$
مقاومت لغزشی (Pa)	$S^\alpha$	ضریب انرژی پلاستیک	$a$
ماتریس سخت‌شوندگی	$h_{\alpha\beta}$	مدول برشی (Pa)	$\mu$
ضریب مویبیلیتی ( $m^3(J \cdot s)^{-1}$ )	$L_{pq}^\xi$	اندازه بردار برگرز (m)	$b$
		چگالی نابجایی ( $m^{-2}$ )	$\rho_\alpha$

## ۱. مقدمه

پارامترهای مختلفی نظیر دما، بارگذاری مکانیکی، شرایط مرزی، ناهمگنی فازها و غیره قرار دارند. در شرایط ایده‌آل، نیروی محرکه‌ی رشد دانه ناشی از کاهش انرژی مرزدهانه<sup>۱۸</sup> است که به رشد نرمال دانه‌ها منجر می‌شود. اما در بسیاری از مواد، نیروهای محرکه‌ی اضافی همانند ناشی از انرژی‌های کرنشی الاستیک و پلاستیک سبب بروز رشد غیرعادی دانه‌ها می‌شود که در آن برخی از دانه‌ها به‌طور ترجیحی رشد کرده و سایر دانه‌ها را مصرف می‌کنند (۱).

مطالعات متعدد کلاسیک و مدرن به بررسی مکانیزم‌های رشد غیرعادی دانه پرداخته‌اند. گوتشتین و همکاران در ۲۰۰۹ و جمشیدیان و همکاران در ۲۰۱۶ نشان دادند که بارگذاری‌های مکانیکی و کرنش‌های الاستیک موجب ایجاد نیروی محرکه اضافی و رشد ترجیحی برخی دانه‌ها می‌شود (۱-۲). تانکس و میل در ۲۰۱۱ نیز با شبه‌سازی میدان فاز رشد دانه‌ها تحت تنش، نقش

بررسی تغییرات میکروساختار و رفتار مکانیکی مواد فلزی از مباحث اساسی علوم و مهندسی مواد است. بسیاری از تغییرات در خواص ماکروسکوپی مواد ناشی از تحولات ریزساختاری از قبیل تغییر در اندازه، شکل، توزیع و جهت‌گیری دانه‌ها است. در سال‌های اخیر، مطالعات متعددی بر روی شناخت رابطه میان ریزساختار و خواص مکانیکی متمرکز شده‌اند تا از طریق درک دقیق فرآیندهای ریزمقیاس، بتوان رفتار ماکروسکوپی مواد را پیش‌بینی کرد. ساختار چندبلوری، مرزدهانه‌ها و نحوه‌ی تکامل آنها نقش کلیدی در تعیین خواص فیزیکی و مکانیکی مواد دارند و در نتیجه، شبه‌سازی و مدل‌سازی فرایندهای رشد و تغییرشکل دانه‌ها به یکی از محورهای مهم پژوهشی تبدیل شده است. در میان پدیده‌های ریزساختاری، رشد دانه‌ها<sup>۱۷</sup> و حرکت مرزدهانه‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. این فرآیندها تحت تأثیر

روش‌های عددی در مهندسی، سال ۴۵، شماره ۱، تابستان ۱۴۰۵

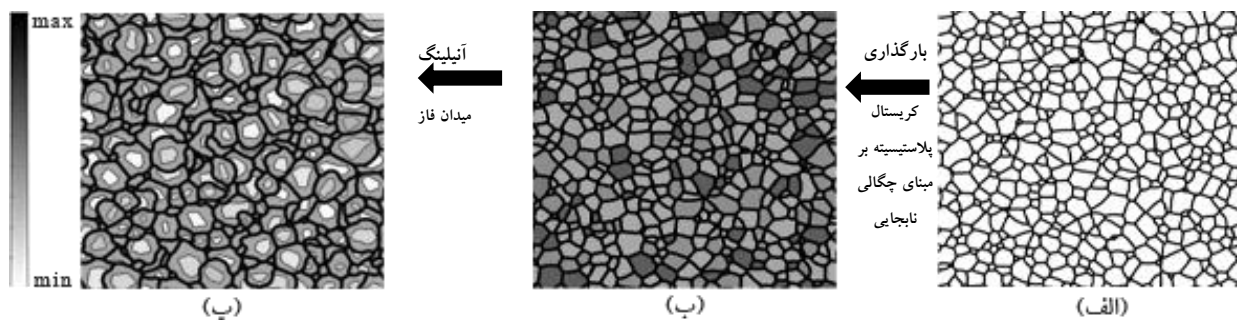
غیرنرمال دانه‌ها دارند (۱۴). مدل توسعه‌یافته آنان در سال ۲۰۲۲ توسط لیو و همکاران برای رشد دانه در آلیاژهای آلومینیوم در عملیات حرارتی نیز استفاده شد (۱۵). قدرت این رویکرد کوپل شده، راه را برای مدل‌سازی پدیده‌های پیچیده‌تر نیز باز کرده است؛ به طوری که پژوهش‌های اخیر از چارچوب‌های مشابهی برای کوپل کردن کریستال پلاستیسیته با مدل‌های میدان فاز شکست استفاده کرده‌اند تا بتوانند جوانه‌زنی و انتشار ترک‌های بین‌دانه‌ای<sup>۲۰</sup> و میان‌دانه‌ای<sup>۲۱</sup> را تحت تأثیر ریزساختار و ناهمگنی‌های پلاستیک، شبیه‌سازی کنند (۱۶).

افزون بر نقش نابجایی‌ها و انرژی‌های کرنشی، پژوهش‌های جدید نشان داده‌اند که حجم اضافی مرزدانه نیز در رشد دانه‌های تحت تنش و عملیات حرارتی نقش بسزایی دارد. ورشابی و همکاران در ۲۰۲۵ یک نظریه سازگار ترمودینامیکی برای لحاظ کردن اثر حجم اضافی مرزدانه در رشد دانه توسعه دادند. در این کار نشان داده شد که آزادسازی حجم اضافی مرزدانه در جریان رشد دانه موجب ایجاد تنش‌های پسماند و کرنش‌های قابل اندازه‌گیری در ماده می‌شود (۱۷). اهمیت این پژوهش در آن است که نشان می‌دهد پدیده‌های حجمی و میکروساختاری در مقیاس نانو می‌توانند تأثیر قابل توجهی بر سینتیک حرکت مرزدانه حتی در دماهای متوسط داشته باشند. این یافته‌ها دیدگاه جدیدی در تحلیل رشد دانه‌های تحت تنش ایجاد کرده و ضرورت استفاده از مدل‌های چندفیزیکی شامل نابجایی و حجم اضافی مرزدانه را تقویت می‌کند. چاترجی و همکاران در ۲۰۲۴ به بررسی تکامل میکروساختار طی فرآیند تبلور مجدد دینامیکی در آلیاژ تیتانیوم دوفازی با استفاده از مدل یکپارچه از کریستال پلاستیسیته-میدان فاز پرداختند. آنها به بررسی تأثیر چگالی نابجایی، نرخ برش و فاکتور اشمید روی شروع تبلور مجدد دینامیکی در مکان‌های مختلف میکروساختار برای مورفولوژی‌های مختلف تیتانیوم پرداختند (۱۸).

در مجموع، یافته‌های تجربی و عددی نشان می‌دهند که انرژی ذخیره‌شده ناشی از نابجایی‌ها، میدان‌های تنش-کرنش و حتی تغییرات حجمی مرزدانه، همگی می‌توانند به‌عنوان نیروی

ناهمگنی انرژی کرنشی در رشد غیرنرمال را تأیید کردند (۳). همچنین، شیه و همکاران در ۲۰۲۴ در سطح اتمی نشان داده‌اند که خود کرنش الاستیک در فصل مشترک مرزدانه‌ها می‌تواند نیروی محرکه مستقیمی برای هسته‌زایی و رشد فازهای جدید ایجاد کند که این موضوع بر اهمیت درک دقیق میدان‌های کرنش موضعی تأکید دارد (۴). در تغییرشکل پلاستیک، تنها بخشی از کار انجام شده بر روی ماده به صورت انرژی ذخیره‌شده باقی می‌ماند که غالباً به صورت چگالی نابجایی‌ها است. مطالعات اولیه بور در ۱۹۷۱ و رزاکیس در ۲۰۰۰ نشان داد که تنها ده تا پانزده درصد انرژی تغییرشکل در ماده ذخیره می‌شود (۶-۵). بنزرگا و همکاران در ۲۰۰۵ با استفاده از مدل چگالی نابجایی، نقش جهت‌گیری بلوری<sup>۱۹</sup> و تراکم نابجایی‌ها بر انرژی ذخیره‌شده را بررسی کردند (۷). بنابراین در تغییرشکل پلاستیک به خاطر وجود جهت‌های کریستالی منحصر به فرد برای هر دانه، انرژی ذخیره‌شده ناشی از تغییرشکل داخل هر دانه متفاوت می‌باشد و همین نیروی محرک لازم برای حرکت مرزدانه متأثر از کرنش یا SIBM را فراهم می‌کند. بنابراین SIBM به عنوان حرکت بخشی از مرزدانه‌ی موجود تعریف می‌شود که منطقه‌ای با مقدار نابجایی کمتر را پس از حرکت به جا می‌گذارد و کل انرژی ذخیره‌شده در پلی‌کریستال را کاهش می‌دهد. برای فرآیند SIBM ایستایی رشد غیر عادی دانه‌ها در دمای بالا پس از اعمال تغییرشکل پلاستیک در دمای محیط رخ می‌دهد، در حالی که برای فرآیند SIBM دینامیکی رشد غیر عادی دانه همزمان با اعمال تغییرشکل اتفاق می‌افتد (۱۱-۸).

در سال‌های اخیر، تلاش‌های گسترده‌ای برای کوپل مدل‌های کریستال پلاستیسیته مبتنی بر نابجایی با روش میدان فاز صورت گرفته است. ژانو و همکاران در ۲۰۱۶ با کوپل عددی این دو مدل، رفتار SIBM دینامیکی را مدل‌سازی کردند (۱۲). جعفری و همکاران در ۲۰۱۷ با ارائه‌ی یک چارچوب سازگار ترمودینامیکی، مدل کوپل شده کریستال پلاستیسیته-میدان فاز را توسعه دادند و اثر چگالی نابجایی‌ها بر حرکت مرزدانه را تحلیل کردند (۱۳). آنان در مطالعه سال ۲۰۱۹ نشان دادند که اندازه دانه و تغییرات انرژی کرنشی نقش تعیین‌کننده‌ای در بروز رشد



شکل ۱. مدل‌سازی SIBM استاتیکی برای یک حجمک نماینده چندبلوری از طریق کوپل شدن تدریجی روش‌های کریستال پلاستیسیته و میدان فاز. (الف) میکروساختار اولیه حجمک نماینده قبل از تغییر شکل، (ب) حجمک نماینده تغییر شکل یافته قبل از آنیلینگ<sup>۲۲</sup> که تجمع ناهمگن انرژی تغییر شکل ذخیره شده در مقیاس دانه‌ها را نشان می‌دهد، (پ) حجمک نماینده آنیل شده که رشد دانه‌ها را از طریق SIBM استاتیکی نشان می‌دهد.

## ۲. نظریه چندمقیاسی

یک نقطه‌ی مادی در مقیاس ماکروسکوپی که درون یک فلز چندبلوری قرار دارد در نظر گرفته شده است. در این پژوهش، بر المان حجمک نماینده‌ی آن نقطه مادی در مقیاس مزو تمرکز شده است. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، مدل SIBM استاتیکی از یک کوپل ترتیبی میان دو مدل کریستال پلاستیسیته مبتنی بر چگالی نابجایی و میدان فاز بهره می‌برد که توسط جعفری و همکاران در ۲۰۱۹ بسط داده شده است (۱۴).

مدل کریستال پلاستیسیته مبتنی بر چگالی نابجایی برای شبیه‌سازی تغییر شکل پلاستیک در دمای اتاق در حجمک نماینده چندبلوری و همچنین محاسبه‌ی تکامل انرژی تغییر شکل ذخیره شده در دانه‌های منفرد، به کار می‌رود. پس از اتمام مرحله‌ی تغییر شکل و تکامل چگالی نابجایی‌ها، دمای حجمک نماینده به صورت آنی افزایش می‌یابد تا روش میدان فاز برای شبیه‌سازی عملیات حرارتی در دمای بالا مورد استفاده قرار گیرد. این فرآیند شامل رشد دانه‌ی غیرعادی از طریق SIBM استاتیکی است (۱۴).

در مدل‌سازی میدان فاز رشد دانه در فلزات خالص، یک حجمک نماینده چندبلوری شامل  $P$  دانه توسط  $P$  متغیر میدان فاز، نمایش داده می‌شود. هر متغیر میدان فاز یا متغیر ساختاری، بیانگر کسر حجمی موضعی یک واحد ساختاری خاص است که یک جهت‌گیری بلوری منفرد را نشان می‌دهد. هر دانه با

محرکه‌ای برای حرکت مرز دانه‌ها عمل کرده و نحوه‌ی رشد دانه‌ها را در طول آنیل یا تحت بارگذاری مکانیکی تعیین کنند. در این میان، درک آماری این رفتارها در مقیاس‌های بزرگتر، خود به یک چالش محاسباتی تبدیل شده است. مطالعات اخیر در حوزه کریستال پلاستیسیته نشان داده‌اند که تعیین اندازه حجمک نماینده برای دستیابی به نتایج همگرا و قابل اتکا از نظر آماری (مثلاً برای پیش‌بینی خواص مکانیکی ماکروسکوپی) امری حیاتی است و اندازه حجمک نماینده مورد نیاز، به شدت به نوع بارگذاری و ناهمگنی ریزساختار بستگی دارد (۱۹).

در این پژوهش، با استفاده از مدل کریستال پلاستیسیته مبتنی بر چگالی نابجایی و کوپل آن با مدل میدان فاز، فرآیند حرکت مرز دانه ناشی از کرنش استاتیکی شبیه‌سازی می‌شود. تأثیر اندازه حجمک نماینده بر رشد غیرعادی دانه‌ها تحت کرنش بررسی می‌شود تا اندازه بهینه برای شبیه‌سازی تعیین شود. در بخش ۲، مدل کریستال پلاستیسیته مبتنی بر چگالی نابجایی و کوپل آن با مدل میدان فاز توضیح داده می‌شود. نتایج شبیه‌سازی برای اندازه‌های مختلف حجمک نماینده در بخش ۳ گزارش می‌شود و در انتها نتیجه‌گیری در بخش ۴ ارائه می‌شود.

$$\begin{aligned} \psi^m &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^P \sum_{j \neq i}^P \omega_{ij}^{\xi} \xi_i \xi_j \\ &- \frac{1}{4} \sum_{i=1}^P \sum_{j \neq i}^P \epsilon_{ij}^{\xi} \mathbf{C}^{-1} : (\nabla \xi_i \otimes \nabla \xi_j) \end{aligned} \quad (2)$$

که  $\omega_{ij}^{\xi}$  و  $\epsilon_{ij}^{\xi}$  پارامترهای مدل میدان فاز هستند. با تعریف تانسور گرادیان تغییرشکل برای آن نقطه مادی توسط  $\mathbf{F}$  با  $\mathbf{J} = \det \mathbf{F} > 0$ ، تانسور  $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$  نشان دهنده تانسور راست تغییرشکل کوشی-گرین برای آن نقطه مادی است. برای هر فاز (هر دانه یا تک بلور منفرد) انرژی آزاد موضعی<sup>۲۴</sup>  $\psi_i^{\xi}$  به صورت جمع سه مؤلفه دمایی، الاستیک و پلاستیک مطابق معادله (۳) بیان می شود (۱۵):

$$\psi_i^{\xi} = \psi_i^{\theta} + \psi_i^e + \psi_i^p, \quad (3)$$

که در آن  $\psi_i^{\theta}$  بخش انرژی آزاد گرمایی مربوط به دما،  $\psi_i^e$  بخش انرژی آزاد ترمو-الاستیک مربوط به کرنش الاستیک و  $\psi_i^p$  بخش انرژی پلاستیک<sup>۲۵</sup> مرتبط با چگالی نابجایی ها است. برای فاز  $i$ ، انرژی گرمایی مطابق معادله (۴) بیان می شود (۲۱):

$$\psi_i^{\theta} = c_{th} \times \left[ (\theta - \theta_0) - \theta \ln \left( \frac{\theta}{\theta_0} \right) \right], \quad (4)$$

که در آن  $c_{th}$  ظرفیت حرارتی ویژه<sup>۲۶</sup> و  $\theta_0$  دمای مرجع<sup>۲۷</sup> است. با تعریف تانسور گرادیان تغییرشکل<sup>۲۸</sup> الاستیک  $\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^e \mathbf{F}_i^p$  و کرنش الاستیک برای فاز  $i$  مطابق معادله (۵):

$$\mathbf{E}_i^e = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i^{eT} \mathbf{F}_i^e - \mathbf{I}), \quad (5)$$

انرژی ترموالاستیک<sup>۲۹</sup> به صورت معادله (۶) نوشته می شود (۲۱):

$$\begin{aligned} \psi_i^e &= \frac{1}{2} [\mathbf{E}_i^e - \alpha_{th} (\theta - \theta_0) \mathbf{I}] : \mathbf{C}_i \\ &: [\mathbf{E}_i^e - \alpha_{th} (\theta - \theta_0) \mathbf{I}], \end{aligned} \quad (6)$$

که در آن  $\alpha_{th}$  ضریب انبساط حرارتی و  $\mathbf{C}_i$  تانسور سختی<sup>۳۰</sup> الاستیک مرتبه چهارم برای فاز  $i$  است. انرژی ذخیره شده در اثر نابجایی ها برای فاز  $i$  را می توان به صورت جمع روی سیستم های لغزش مطابق معادله (۷) بیان کرد (۲۲-۲۴):

$$\psi_i^p = a \mu b^2 \sum_{\alpha=1}^N \rho_i^{\alpha}, \quad (7)$$

که ضریب بدون بعد  $\alpha$  مقدار آن بین ۰/۳ تا ۰/۵ است؛ که در این پژوهش  $\alpha = 0.4$  است (۲۲)،  $\mu$  مدول برشی<sup>۳۱</sup>،  $b$  بردار برگرز<sup>۳۲</sup>،

جهت گیری بلوری خاص خود به یکی از  $P$  متغیرهای ساختاری یا فازی مرتبط است، که مقدار این متغیر در ناحیه ی مربوط به دانه ی خود برابر یک و در سایر نقاط برابر صفر است.

در نظریه ی میدان فاز، مرز دانه ها به صورت میان لایه های پخشی<sup>۳۳</sup> نمایش داده می شوند که نواحی بلورهای منفرد با جهت گیری های بلوری متفاوت را از هم جدا می کنند. این مرز دانه های پخش شامل ناحیه های انتقالی هستند که در آن دو یا چند متغیر فازی مقدار غیر صفر دارند. تغییر پیوسته ی متغیرهای فازی در طول مرز دانه های پخش، تغییر دانه یا تغییر جهت گیری بلوری در عرض مرز دانه ها را نشان می دهد.

در چارچوب میدان فاز، هر زیر ناحیه از حجمک نماینده می تواند در یکی از دو حالت باشد؛ الف- ناحیه ی تک فازی، که بخشی از درون دانه را نمایش می دهد؛ ب- ناحیه ی چند فازی، که بخشی از مرز دانه یا محل تلاقی سه گانه را نمایش می دهد. حرکت مرز دانه ها توسط حرکت میان لایه های پخشی که ناشی از تحولات ساختاری میان فازهای مجاور نماینده ی بخش های مختلف دانه ها است، نمایش داده می شود.

## ۲.۱. معادلات ساختاری

با در نظر گرفتن یک نقطه مادی در مقیاس مزو از المان حجمک نماینده، کسر حجمی از فاز  $i$  متعلق به آن با متغیر  $\xi_i$  نشان داده می شود که دارای محدوده  $0 \leq \xi_i \leq 1$  است و قید فیزیکی  $\sum_{i=1}^P \xi_i = 1$  با توجه به این که جمع فازهای تشکیل دهنده یک نقطه مادی باید یک باشد، وجود دارد. چگالی انرژی آزاد هلمهولتز برای این نقطه مادی،  $\psi$ ، توسط معادله (۱) بیان می شود (۲۱، ۲۰، ۱۳):

$$\psi = \left( \frac{\sum_{i=1}^P g(\xi_i) \psi_i^{\xi}}{\sum_{i=1}^P g(\xi_i)} \right) + \psi^m \quad (1)$$

که  $\psi_i^{\xi}$  چگالی انرژی آزاد برای فاز  $i$  با تابع اسکالر میان یابی یکنواخت  $g(\xi_i) = \xi_i^2 (3 - 2\xi_i)$  بیان می کند و  $\psi^m$  انرژی آزاد میکروساختار توسط معادله (۲) بیان می شود:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{J} \frac{\sum_{i=1}^P g(\xi_i) \mathbf{F}_i^e \mathbf{C}_i : (\mathbf{E}_i^e - \alpha_{th}(\theta - \theta_0) \mathbf{I}) \mathbf{F}_i^{eT}}{\sum_{i=1}^P g(\xi_i)}, \quad (12)$$

با توجه به این که ممکن است در یک گره در مقیاس مزو همانند مرزدهانه چندین فاز وجود داشته باشد، فرض می‌شود تانسور گرادیان تغییرشکل فازهای تشکیل دهنده آن گره همگی باهم برابر و  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_i$  است.

### ۳.۲. قانون جریان ویسکوپلاستیک

تانسور اشمید مربوط به سیستم لغزش  $\alpha$  برای فاز  $i$  با معادله (۱۳) تعریف می‌شود (۲۰):

$$\mathbf{S}_{i,0}^\alpha = \mathbf{s}_{i,0}^\alpha \otimes \mathbf{m}_{i,0}^\alpha. \quad (13)$$

در این معادله،  $\mathbf{m}$  بردار جهت لغزش و  $\mathbf{s}$  بردار نرمال صفحه لغزش است. در این صورت، تنش برشی برآیند بر روی سیستم لغزش  $\alpha$  از معادله (۱۴) به دست می‌آید:

$$\tau_i^\alpha = \mathbf{F}_i^{eT} \mathbf{F}_i^e \mathbf{T}_i^e : \mathbf{S}_{i,0}^\alpha, \quad (14)$$

که در آن  $\mathbf{F}_i^e$  تانسور گرادیان تغییرشکل الاستیک و  $\mathbf{T}_i^e$  تانسور تنش الاستیک را نشان می‌دهد. قانون جریان ویسکوپلاستیک، به صورت معادله (۱۵) تعریف می‌شود (۲۰):

$$\dot{\gamma}_i^\alpha = \gamma_0^\alpha \left( \frac{|\tau_i^\alpha| - \left(\frac{1}{2}\right) \mu b^2 K_1 \sqrt{\rho_i^\alpha}}{S_i^\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau_i^\alpha). \quad (15)$$

در این معادله  $\dot{\gamma}_0^\alpha$  نرخ مرجع برشی،  $\mu$  مدول برشی،  $b$  بردار برگرز،  $K_1$  ضریب تجمع نابجایی‌ها،  $m$  ضریب حساسیت نرخ برشی،  $S_i^\alpha$  مقاومت لغزشی برای سیستم لغزش  $\alpha$  برای فاز  $i$ ،  $\rho_i^\alpha$  چگالی نابجایی در سیستم لغزش  $\alpha$  و  $\text{sgn}(\tau_i^\alpha)$  علامت تنش برشی را مشخص می‌کند. مقاومت لغزشی برای سیستم لغزش  $\alpha$  برای فاز  $i$ ، با استفاده از معادله (۱۶) محاسبه می‌شود (۲۶):

$$S_i^\alpha = \mu b \sqrt{\sum_{\alpha=1} h^{\alpha\beta} \rho_i^\beta}, \quad (16)$$

که در آن  $h^{\alpha\beta}$  ماتریس سخت‌شوندگی متقاطع بین سیستم‌های لغزش  $\alpha$  و  $\beta$  است. با پیروی از کارهای (۲۷، ۲۴)، سخت‌شوندگی همسانگرد و  $h^{\alpha\beta} = 1$  استفاده می‌شود.

$\rho_i^\alpha$  چگالی نابجایی مرتبط با سیستم لغزش  $\alpha$  برای فاز  $i$  و  $N$  بیانگر تعداد سیستم‌های لغزش است. تکامل چگالی نابجایی  $\rho_i^\alpha$  بر سه سازوکار اساسی مبتنی است (۲۳): اول تولید نابجایی بر اثر جریان پلاستیک، دوم نابودی (بازیابی) نابجایی‌ها از طریق مکانیزم‌های حرارتی و سوم کاهش نابجایی پشت مرزدهانه با حرکت مرز است. رابطه بیان کننده تکامل نابجایی مطابق معادله (۸) است:

$$\dot{\rho}_i^\alpha = K_1 \sqrt{\rho_i^\alpha} |\dot{\gamma}_i^\alpha| - K_2 \rho_i^\alpha - \rho_i^\alpha C_d \xi_i u(\xi_i), \quad (8)$$

در معادله (۸)،  $\dot{\rho}_i^\alpha$  مشتق زمانی چگالی نابجایی برای سیستم لغزش  $\alpha$  برای فاز  $i$ ،  $K_1$  ضریب تجمع نابجایی،  $\dot{\gamma}_i^\alpha$  نرخ میکرو-برش روی سیستم لغزش  $\alpha$ ،  $K_2$  ضریب بازیابی،  $C_d$  ضریب تناسبی که مقدار کاهش نابجایی را در نتیجه حرکت مرز کنترل می‌کند،  $\xi_i$  نرخ تغییر متغیر فازی/ساختار و  $u(\xi_i)$  تابع پله‌ای است که مطابق معادله (۹) تعریف می‌شود:

$$u(\xi_i) = \begin{cases} 1 & \text{if } \xi_i \geq 0, \\ 0 & \text{if } \xi_i \leq 0. \end{cases} \quad (9)$$

### ۲.۲. معادلات ساختاری برای تنش و میکرو-ترکشن

برای هر فاز  $i$ ، تانسور تنش کوشی  $\mathbf{T}_i$  از مشتق انرژی آزاد نسبت به کرنش الاستیک مطابق معادله (۱۰) استخراج می‌شود (۲۵):

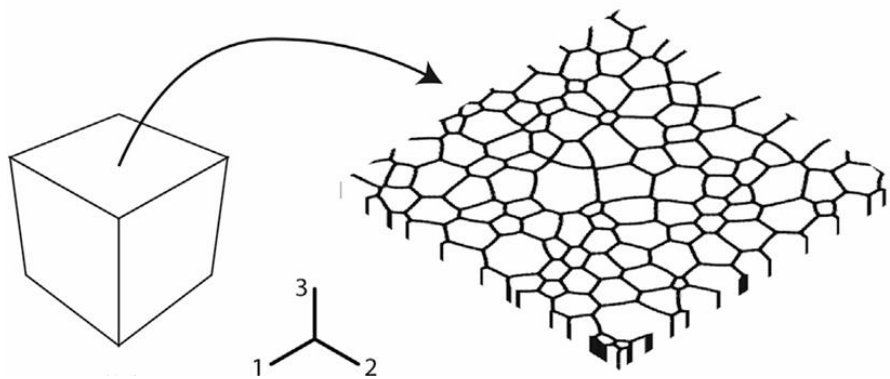
$$\mathbf{T}_i = \left(\frac{1}{J_i}\right) \mathbf{F}_i^e \mathbf{C}_i : [\mathbf{E}_i^e - \alpha_{th}(\theta - \theta_0) \mathbf{I}] \mathbf{F}_i^{eT}, \quad (10)$$

$i = 1, 2, 3, \dots, P.$

که در آن  $J_i = \det \mathbf{F}_i^e$  میکروترکشن<sup>۳۵</sup> برداری  $\mathbf{h}_i$  برای فاز  $i$ ، از مشتق انرژی آزاد نسبت به گرادیان  $\xi_i$  مطابق معادله (۱۱) بدست می‌آید:

$$\mathbf{h}_i = \frac{\partial \psi}{\partial (\nabla \xi_i)} = \sum_{r \neq i}^P \left( -\frac{\xi_{ir}}{2} \mathbf{C}^{-1} \nabla \xi_r \right). \quad (11)$$

برای به دست آوردن تنش مؤثر برای زیرحجمی که از ترکیب چند فاز تشکیل شده، از میانگین‌گیری وزن‌دار با تابع  $g(\xi_i)$  استفاده شده است. رابطه نهایی که تنش کوشی در نقطه مادی را بیان می‌کند، در معادله (۱۲) نشان داده شده است:



شکل ۲. یک هندسه مکعبی ساده با المان آجری سه بعدی هشت گره‌ای با یک نقطه انتگرال‌گیری در مرکز آن تحت بارگذاری کشش ساده در جهت یک که مدل حجمک نماینده اولیه به آن نقطه اجزای محدود در مقیاس ماکرو الحاق شده است.

#### ۴.۲. روابط سینتیکی برای متغیرهای ساختاری

چون ساختارهای فازی  $\xi_i$  مقدار نسبت حجمی فاز را نشان می‌دهند، همواره الزام معادله (۱۷) برقرار است که (۲۱):

$$\sum_{i=1,\dots,P} \xi_i = 1 \Rightarrow \sum_{i=1,\dots,P} \xi_i = 0. \quad (17)$$

برای تضمین این قید در شبیه‌سازی، رابطه سینتیکی متغیرهای فازی به فرم معادله (۱۸) نوشته می‌شود:

$$\dot{\xi}_i = \sum_{p < q} H_{ipq} \zeta_{pq} \quad (18)$$

در این معادله  $H_{ipq}$  ضرایب ساختاری هستند و مقادیر آن‌ها برابر  $-1$ ،  $+1$  یا صفر است. این ضرایب به گونه‌ای تعریف می‌شوند که همواره قید  $\sum_{i=1,\dots,P} \xi_i = 0$  برقرار باشد.

سرعت تبدیل بین دو دانه  $p$  و  $q$  به صورت معادله (۱۹) تعریف می‌شود:

$$\zeta_{pq} = \begin{cases} L_{pq}^{\xi} f_{pq}^{\xi} & \text{if } |\nabla \xi_p| > 0, |\nabla \xi_q| > 0, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (19)$$

که در آن  $L_{pq}^{\xi} = L_{pq}^{\xi}(\theta) > 0$  موبیلیتی بین دو دانه (وابسته به دما) و  $f_{pq}^p + f_{pq}^m = f_{pq}^{\xi}$  نیروی محرکه کل برای حرکت مرز دانه بین دو دانه است که نیروی  $f_{pq}^m$  مربوط به نیروی محرکه مرز دانه و انحناست، درحالی‌که نیروی  $f_{pq}^p$  ناشی از اختلاف انرژی ذخیره شده بین دو دانه مجاور است (۲۸).

#### ۵.۲. همگن‌سازی محاسباتی<sup>۳۶</sup>

معادلات ساختاری ارائه شده به صورت محاسباتی چندمقیاسی تیلور پیاده‌سازی می‌شوند (۲۹). در چارچوب مدل چندمقیاسی، برای پیاده‌سازی روابط سینتیک در مقیاس مزو از میدان فاز استفاده می‌شود درحالی‌که روش اجزای محدود، پاسخ ترمومکانیکی در مقیاس ماکرو از حجمک نماینده را محاسبه می‌کند (۲۱). در این روش، محاسبات مکانیکی در نرم‌افزار اجزای محدود آباکوس با استفاده از زیربرنامه یومت<sup>۳۷</sup> انجام می‌شود تا پاسخ تنش-کرنش همگن شده حجمک نماینده به دست آید. تکامل فاز و حرکت مرز دانه‌ها با روش اختلاف محدود در شبکه‌ای با گام  $\Delta x = 0.1 \mu m$  انجام می‌شود. به هر نقطه انتگرال‌گیری یک حجمک نماینده الحاق می‌شود.

برای شبکه دوبعدی با ابعاد  $N_x \times N_y$  گره، طول فیزیکی حجمک نماینده به صورت معادله (۲۰) محاسبه می‌شود:

$$L_{RVE} = N_{grid} \times \Delta x. \quad (20)$$

#### ۳. شبیه‌سازی عددی

در این قسمت، نتایج شبیه‌سازی فرآیند حرکت مرز دانه‌ی متأثر از کرنش استاتیکی، برای ریزساختارهای چندمقیاسی ارائه می‌شود. مطالعات حاضر بر پایه‌ی مدل چندمقیاسی میدان فاز و اجزای محدود انجام شده است. همان‌طور که شکل ۲ نشان می‌دهد این

جدول ۱. پارامترهای مدل مورد استفاده در شبیه‌سازی SIBM برای ماده آلومینیوم

پارامتر	نماد	مقدار	واحد
اندازه بردار برگرز	b	$2.863 \times 10^{-10}$	m
تعداد سیستم‌های لغزش	N	12	-
ضریب انرژی پلاستیک	$\alpha$	0.4	-
مدول تجمع نابجایی	$K_1$	250	$\mu m^{-1}$
مدول بازیابی	$K_2$	0.01	$s^{-1}$
ضریب کاهش نابجایی پشت مرز	$C_d$	5	-
نرخ کرنش برشی مرجع	$\dot{\gamma}_0$	0.001	$s^{-1}$
حساسیت به نرخ کرنش	m	0.011	-
چگالی نابجایی اولیه	$\rho_0^\alpha$	0.01	$\mu m^{-2}$
انرژی مرزدانه	$\gamma^\xi$	0.324	$J m^{-2}$
موبیلیتی مرزدانه	$M^\xi$	$1.0 \times 10^{-14}$	$m^4 (J.s)^{-1}$
گام شبکه	$\Delta$	0.1	$\mu m$
ضخامت مرزدانه پخش	$l^\xi$	0.6	$\mu m$
ضریب موبیلیتی میدان فاز	$L^\xi$	$2.06 \times 10^{-8}$	$m^3 (J.s)^{-1}$
ضریب گرادیان انرژی میدان فاز	$\epsilon^\xi$	$1.576 \times 10^{-1}$	$J m^{-1}$

و با در نظر گرفتن تقارن مکعبی به صورت معادله (۲۱) تعریف می‌شوند (۱۴):

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= (123.323 + 6.7008 \times 10^{-8} \theta^3 \\
 &\quad - 1.1342 \times 10^{-4} \theta^2 \\
 &\quad - 7.8788 \times 10^{-3} \theta) GPa \\
 C_{12} &= (70.6512 + 4.4105 \times 10^{-8} \theta^3 \\
 &\quad - 7.5498 \times 10^{-5} \theta^2 \\
 &\quad - 3.9992 \times 10^{-3} \theta) GPa \\
 C_{44} &= (31.2071 + 7.0477 \times 10^{-9} \theta^3 \\
 &\quad - 1.2136 \times 10^{-5} \theta^2 \\
 &\quad - 8.3274 \times 10^{-3} \theta) GPa
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

مدول برشی طبق معادله (۲۲) محاسبه می‌شود (۲۳):

$$\mu = \sqrt{0.5(C_{11} - C_{12})C_{44}} \tag{22}$$

پارامترهای میدان فاز دارای تعریف مشخصی بر حسب انرژی مرزدانه  $\gamma_{pq}^\xi$ ، ضخامت مرزدانه  $l_{pq}^\xi$  و موبیلیتی مرزدانه  $M_{pq}^\xi$  میان دانه‌های p و q دارند که در معادلات (۲۳) نشان داده شده‌اند:

$$\omega_{pq}^\xi = \frac{4\gamma_{pq}^\xi}{l_{pq}^\xi}, \quad \epsilon_{ij}^\xi = \frac{8}{\pi^2} \gamma_{pq}^\xi l_{pq}^\xi, \quad L_{pq}^\xi = \frac{\pi^2 M_{pq}^\xi}{8 l_{pq}^\xi} \tag{23}$$

پارامترهای مورد نیاز شبیه‌سازی در جدول ۱ آمده است (۱۴).

مدل چندمقیاسی از یک هندسه مکعبی ساده در مقیاس ماکرو با یک المان آجری سه بعدی هشت گره‌ای با یک نقطه انتگرال‌گیری در مرکز آن در نرم افزار اجزای محدود آباکوس تشکیل شده است که یک المان حجمک نماینده اولیه نشان دهنده پلی کریستال با مرزدانه پخش در مقیاس مزو به آن متصل می‌شود. با هدف بررسی تأثیر اندازه‌ی المان حجمک نماینده بر تکامل ریزساختار، شش دامنه‌ی عددی در مقیاس مزو با ابعاد  $100 \times 100$ ،  $200 \times 200$ ،  $300 \times 300$ ،  $400 \times 400$ ،  $500 \times 500$  و  $600 \times 600$  گره در نظر گرفته می‌شود. شبیه‌سازی در سه مرحله اصلی تولید ریزساختار اولیه، بارگذاری پلاستیک و فرآیند عملیات حرارتی انجام می‌شود. تغییرات میکروساختار، چگالی نابجایی، تعداد دانه و اندازه‌ی میانگین دانه تحلیل و مقایسه می‌شوند.

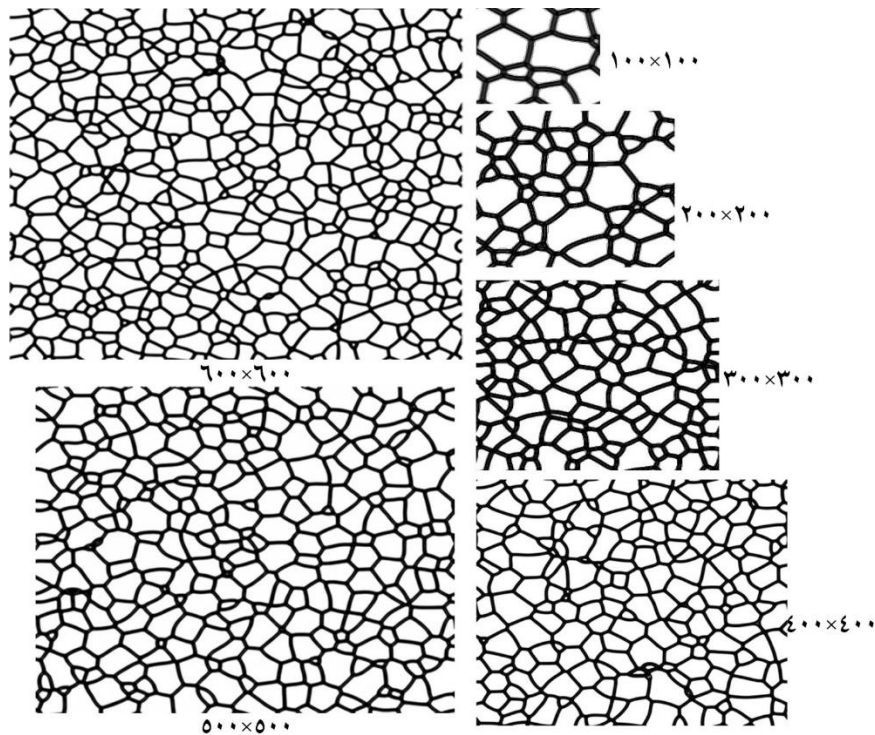
### ۱.۳. تعیین پارامترهای مدل

مولفه‌های تانسور سفتی الاستیک  $C_{ij}$  بر حسب دمای  $\theta$  بر حسب کلونین و با واحد گیگاپاسکال برای ماده آلومینیوم با ساختار FCC

روش‌های عددی در مهندسی، سال ۴۵، شماره ۱، تابستان ۱۴۰۵

جدول ۲. مشخصات دامنه‌های محاسباتی مورد استفاده در مطالعه اثر اندازه حجمک نماینده

مدل	تعداد گره در هر راستا	تعداد کل گره‌ها	طول دامنه (μm)	قطر میانگین (μm)
RVE-۱۰۰	۱۰۰×۱۰۰	۱۰۰۰۰	۱۰	۳
RVE-۲۰۰	۲۰۰×۲۰۰	۴۰۰۰۰	۲۰	۳
RVE-۳۰۰	۳۰۰×۳۰۰	۹۰۰۰۰	۳۰	۳
RVE-۴۰۰	۴۰۰×۴۰۰	۱۶۰۰۰۰	۴۰	۳
RVE-۵۰۰	۵۰۰×۵۰۰	۲۵۰۰۰۰	۵۰	۳
RVE-۶۰۰	۶۰۰×۶۰۰	۳۶۰۰۰۰	۶۰	۳

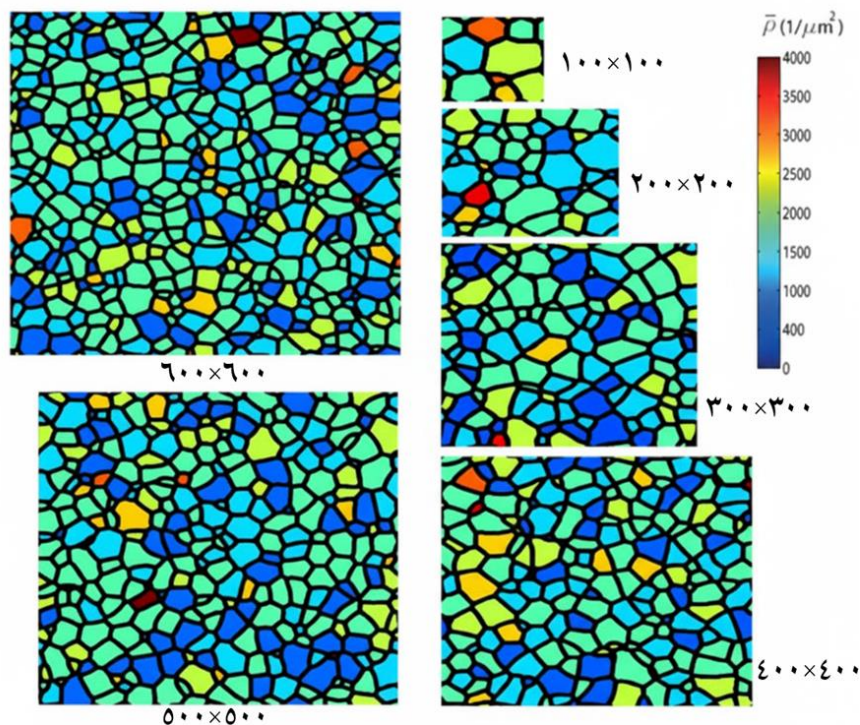


شکل ۳. میکروساختارهای اولیه شبیه‌سازی شده در ابعاد مختلف المان حجمک نماینده با گام شبکه‌ی  $\Delta x = 0.1$  شامل دامنه‌های  $۱۰۰ \times ۱۰۰$ ،  $۲۰۰ \times ۲۰۰$ ،  $۳۰۰ \times ۳۰۰$ ،  $۴۰۰ \times ۴۰۰$ ،  $۵۰۰ \times ۵۰۰$  و  $۶۰۰ \times ۶۰۰$  گره.

### ۲.۳. تولید ریزساختار اولیه

با هدف تعیین اندازه‌ی المان حجمک نماینده، شش المان حجمک نماینده مختلف در مقیاس مزو با ابعاد مختلف ایجاد می‌شوند. با توجه به ثابت بودن گام شبکه در مقیاس مزو ( $\Delta x = 0.1$ ) ابعاد مختلف دامنه‌ها منجر به تغییر تعداد کل گره‌ها از ۱۰۰۰۰ در مدل  $۱۰۰ \times ۱۰۰$  تا مقدار ۳۶۰۰۰۰ در مدل  $۶۰۰ \times ۶۰۰$  می‌شوند. جدول ۲ مشخصات دامنه‌های محاسباتی مورد استفاده در مطالعه اثر

اندازه حجمک نماینده را بیان می‌کند. ضخامت مرزدانه‌ها برای همه مدل‌ها ۶ برابر گام شبکه در نظر گرفته می‌شود. شکل ۳ میکروساختارهای اولیه‌ی استفاده شده برای ابعاد مختلف المان حجمک نماینده با گام شبکه‌ی  $\Delta x = 0.1$  شامل مدل‌های  $۱۰۰ \times ۱۰۰$ ،  $۲۰۰ \times ۲۰۰$ ،  $۳۰۰ \times ۳۰۰$ ،  $۴۰۰ \times ۴۰۰$  و  $۵۰۰ \times ۵۰۰$  و  $۶۰۰ \times ۶۰۰$  گره را نشان می‌دهد. بنابراین، اندازه المان حجمک نماینده در فلز پلی کریستال آلومینیوم، در محدوده ۱۰ تا ۶۰



شکل ۴. توزیع چگالی نابجایی ذخیره شده در داخل میکروساختار بعد از بارگذاری پلاستیک.

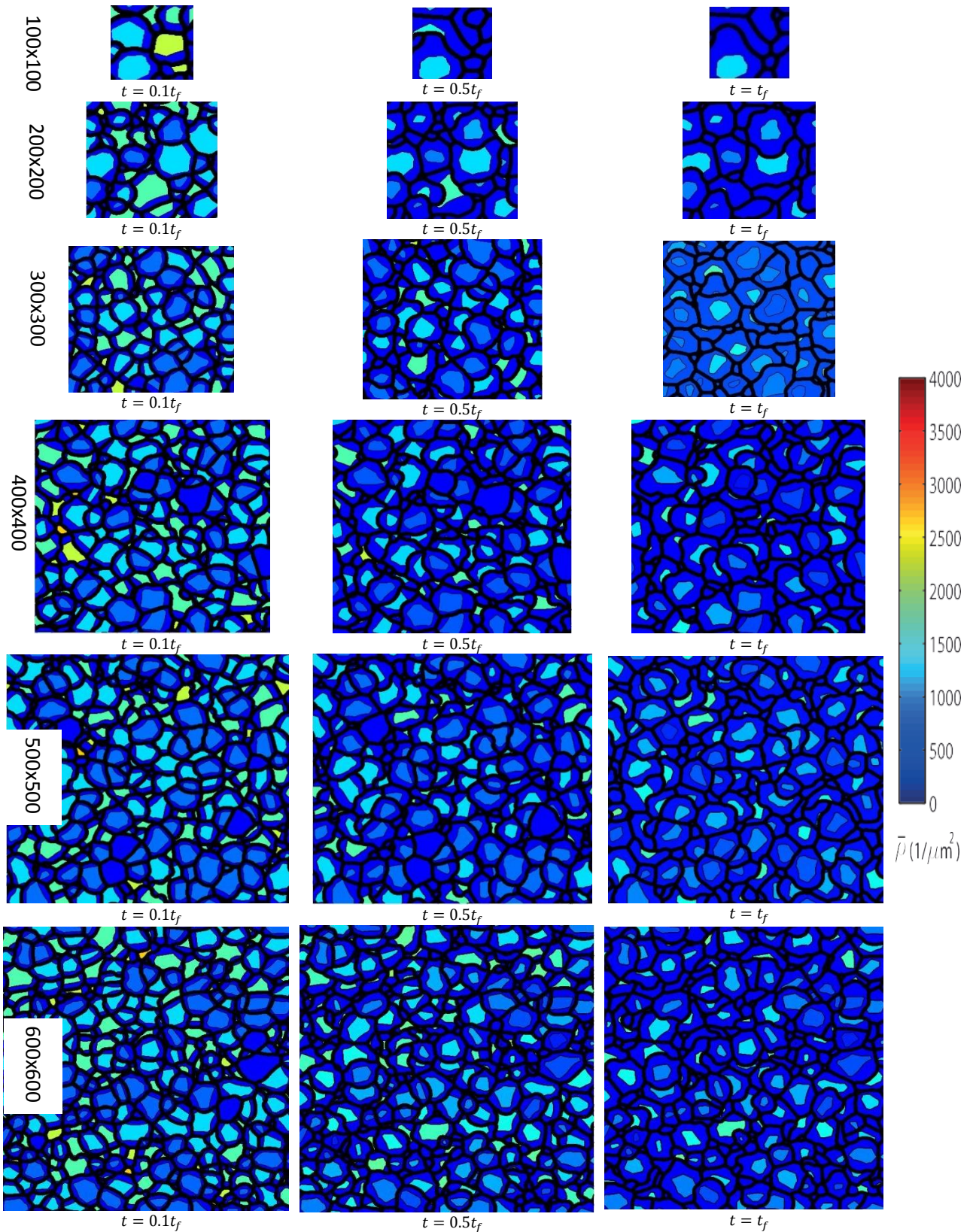
#### ۴.۳. فرآیند عملیات حرارتی

پس از اتمام بارگذاری، دما به صورت لحظه‌ای به مقدار دمای عملیات حرارتی افزایش می‌یابد و حلگر میدان فاز برای شبه‌سازی فرآیند عملیات حرارتی در دماهای بالا اجرا می‌شود. در این مرحله، انرژی ذخیره‌شده ناشی از نابجایی‌ها و نیروی محرک انحنای دو نیروی محرک برای حرکت مرزانه‌ها هستند. تکامل مرزانه‌ها در سه بازه‌ی زمانی بدون بُعد  $t = 0.1t_f$ ،  $t = 0.5t_f$ ،  $t = t_f$  بررسی شد. زمان برای هر یک از حجمک نماینده‌ها نشان‌دهنده زمانی است که اندازه میانگین قطر دانه‌ها به  $1/3$  برابر قطر میانگین اولیه می‌رسد. شکل ۵ تکامل میکروساختار طی فرآیند آنیلینگ در زمان‌های مختلف، برای المان‌های حجمک نماینده مختلف را نشان می‌دهد. از تغییرات میکروساختار برای همه حجمک نماینده‌ها مشخص است که نیروی محرک ناشی از اختلاف انرژی کرنشی در دو طرف مرزانه غالب است و با گذشت زمان، دانه‌های با چگالی نابجایی ذخیره شده کمتر به صورت غیرنرمال رشد می‌کنند و دانه‌های با چگالی نابجایی ذخیره شده بیشتر را مصرف می‌کنند.

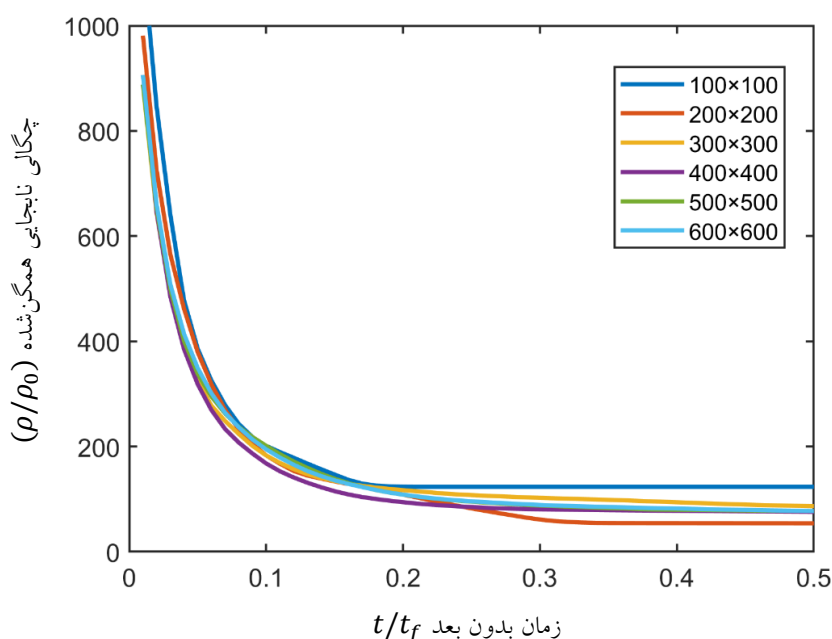
میکرومتر و با قطر میانگین ۳ میکرومتر تغییر می‌کند تا اندازه بهینه پیدا شود. جهت گیری کریستالی اولیه به صورت تصادفی به دانه‌ها تخصیص داده می‌شود.

#### ۳.۳. مرحله بارگذاری پلاستیک

در این مرحله، برای شبه‌سازی بار اعمال‌شده بر المان‌های حجمک نماینده در دمای اتاق از مدل کریستال پلاستیسیته بر مبنای چگالی نابجایی استفاده می‌شود. بارگذاری به صورت کشش محوری با کرنش کل  $0.34$  اعمال گردید. در طی این فرآیند، نابجایی‌های آماری ذخیره‌شده درون هر دانه افزایش یافته و موجب افزایش انرژی آزاد کل سیستم می‌گردند. در پایان مرحله‌ی بارگذاری، نقشه‌های توزیع چگالی نابجایی و تنش مؤثر در هر حجمک نماینده ثبت گردیدند. شکل ۴ توزیع چگالی نابجایی ذخیره شده در داخل میکروساختار بعد از بارگذاری پلاستیک را نشان می‌دهد. وجود رنگ‌های متفاوت نشان‌دهنده‌ی آن است که میزان چگالی نابجایی ذخیره شده در داخل هر دانه با توجه به جهت گیری بلوری خاص آن دانه متفاوت است.



شکل ۵. تکامل میکروساختار، طی فرآیند آنیلینگ در زمان‌های مختلف، برای دامنه‌های  $۱۰۰ \times ۱۰۰$ ،  $۲۰۰ \times ۲۰۰$ ،  $۳۰۰ \times ۳۰۰$ ،  $۴۰۰ \times ۴۰۰$ ،  $۵۰۰ \times ۵۰۰$  و  $۶۰۰ \times ۶۰۰$ .



شکل ۶. تغییرات چگالی نابجایی همگن شده  $(\rho/\rho_0)$  بر حسب زمان بدون بعد  $(t/t_f)$  برای حجمک نماینده‌های مختلف.

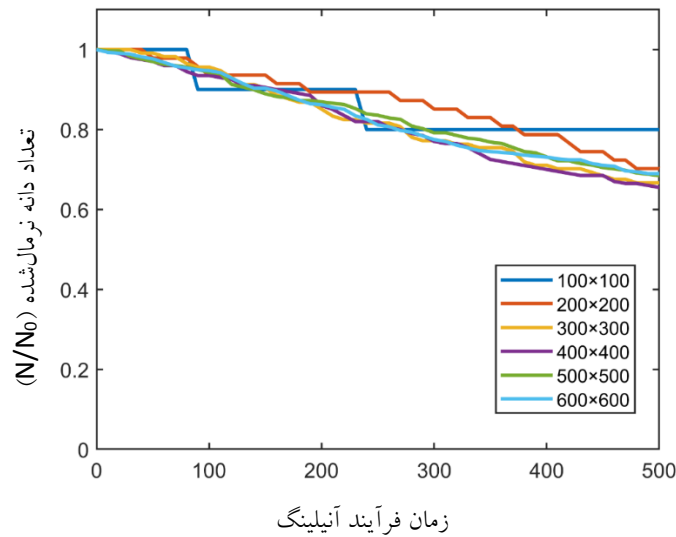
### ۵.۳. تغییرات پارامترهای میکروساختاری

در ادامه به بررسی اثر اندازه حجمک نماینده بر روی تغییرات پارامترهای میکروساختار پرداخته می‌شود. شکل ۶ تغییرات چگالی نابجایی همگن شده در کل میکروساختار  $(\rho/\rho_0)$  بر حسب زمان بدون بعد  $(t/t_f)$  برای حجمک نماینده‌های مختلف را نشان می‌دهد. چگالی نابجایی نرمال شده در طی فرآیند عملیات حرارتی به صورت نمایی کاهش یافته است. این روند ناشی از حذف دانه‌های پرانرژی و ایجاد منطقه‌عاری از نابجایی در پشت مرزدهانه متحرک است. کاهش سریع چگالی نابجایی در زمان‌های اولیه ناشی از حذف سریع دانه‌های با چگالی نابجایی بالا به خاطر نیروی محرک ناشی از اختلاف انرژی کرنشی ذخیره شده در دو طرف مرزدهانه است. در ادامه چون دانه‌های با انرژی ذخیره شده کمتر باقی می‌مانند و گرادیان انرژی ذخیره شده بین دانه‌ها کمتر است، دیگر نیروی محرک انحنا غالب می‌شود و چگالی نابجایی در داخل میکروساختار تقریباً ثابت می‌شود. شکل ۶ نشان می‌دهد که برای ابعاد حجمک نماینده بزرگتر مساوی ۳۰۰ نتایج تقریباً یکسان هستند. شکل ۷ تغییرات تعداد کل دانه‌های میکروساختار

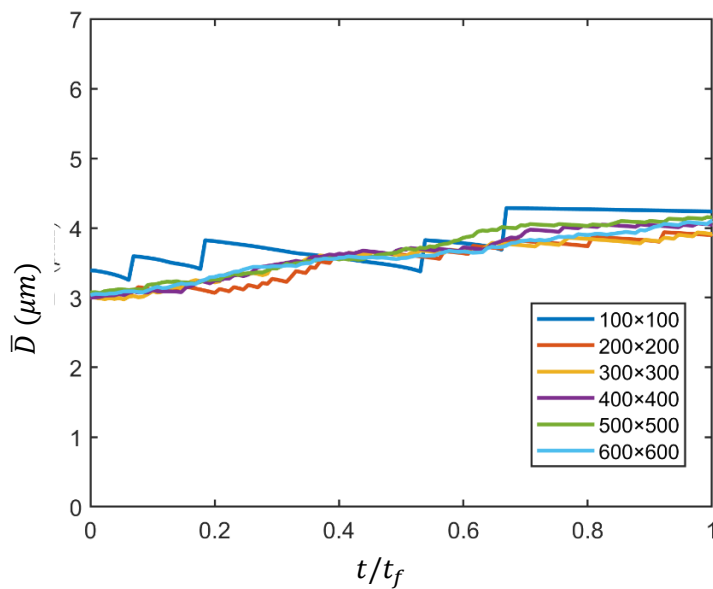
نرمال شده  $(N/N_0)$  در طول فرآیند آنیلینگ برای ابعاد مختلف حجمک نماینده را نشان می‌دهد. نمودار تغییرات تعداد دانه‌ها نشان می‌دهد که با افزایش زمان، تعداد کل دانه‌ها کاهش می‌یابد. در ابعاد کوچک‌تر حجمک نماینده به دلیل تعداد کم دانه‌ها، نرخ کاهش سریع‌تر و داری پرش بوده و فرآیند ادغام دانه‌ها زودتر به پایان می‌رسد. این نمودار بیان کننده آن است که از ابعاد ۳۰۰ در ۳۰۰ نمودار تغییرات دانه‌ها به صورت یکنواخت‌تر و بدون پرش خواهد بود. شکل ۸ تکامل میانگین اندازه‌ی دانه  $(\bar{D})$  نرمال شده بر حسب زمان بدون بعد  $(t/t_f)$  برای ابعاد مختلف حجمک نماینده را نشان می‌دهد. اندازه دانه میانگین  $\bar{D}$ ، در تمامی دامنه‌ها با زمان افزایش یافته است. در دامنه‌های کوچک‌تر، این رشد دارای پرش است زیرا به علت تعداد کم دانه‌ها با حذف یک دانه اثری چشم‌گیر در نمودار دارد. در دامنه‌های بزرگ‌تر، نرخ رشد همگن‌تر است. این نمودار نشان می‌دهد که از ابعاد ۳۰۰ × ۳۰۰ نمودار تغییرات قطر دانه‌ها به صورت یکنواخت‌تر و بدون پرش خواهد بود.

در ادامه، تغییرات آماری اندازه‌ی دانه‌ها  $GSD$  در طول فرآیند بازپخت برای میکروساختارهای اولیه با ابعاد مختلف ۱۰۰ × ۱۰۰،

روش‌های عددی در مهندسی، سال ۴۵، شماره ۱، تابستان ۱۴۰۵



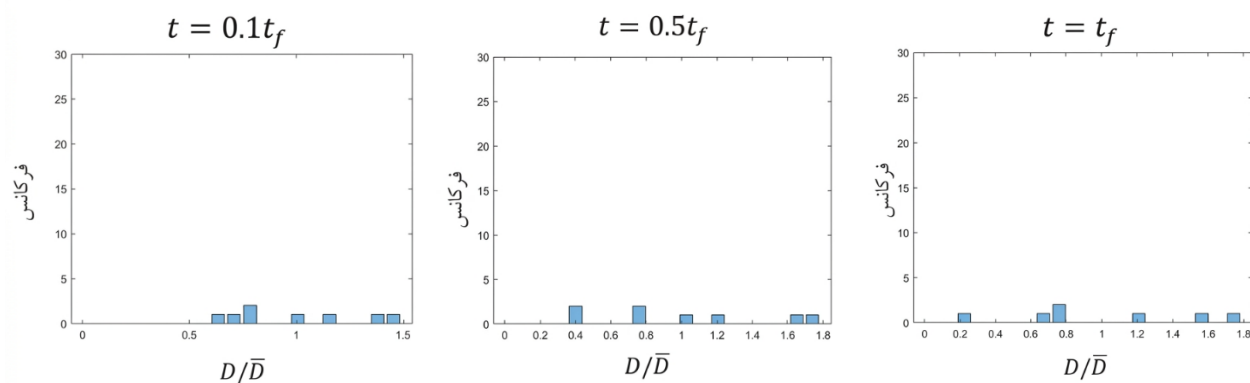
شکل ۷. تغییرات تعداد دانه نرمال شده ( $N/N_0$ ) در طول فرآیند آنیلینگ برای ابعاد مختلف حجمک نماینده. کاهش سریع در ابتدای فرآیند ناشی از حذف دانه‌های کوچک و تثبیت ساختار در مراحل پایانی مشاهده می‌شود. روند تغییرات در حجمک نماینده‌های بزرگ‌تر کندتر است که بیانگر تأثیر ابعاد دامنه بر همگرایی آماری<sup>۳۸</sup> است.



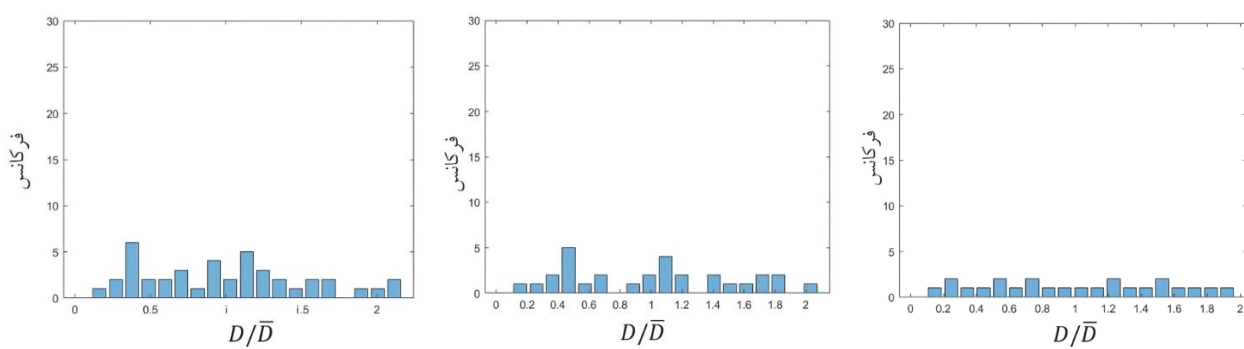
شکل ۸. تکامل میانگین اندازه‌ی دانه ( $\bar{D}$ ) نرمال شده بر حسب زمان بدون بعد ( $t/t_f$ ) برای دامنه‌های مختلف.

ریزساختار در مقیاس‌های مختلف است. برای هر نمونه توزیع نرمال شده اندازه دانه‌ها بر اساس نسبت  $\bar{D}/D$  در چندین گام زمانی محاسبه شد. در اینجا  $D$  اندازه‌ی هر دانه و  $\bar{D}$  میانگین اندازه

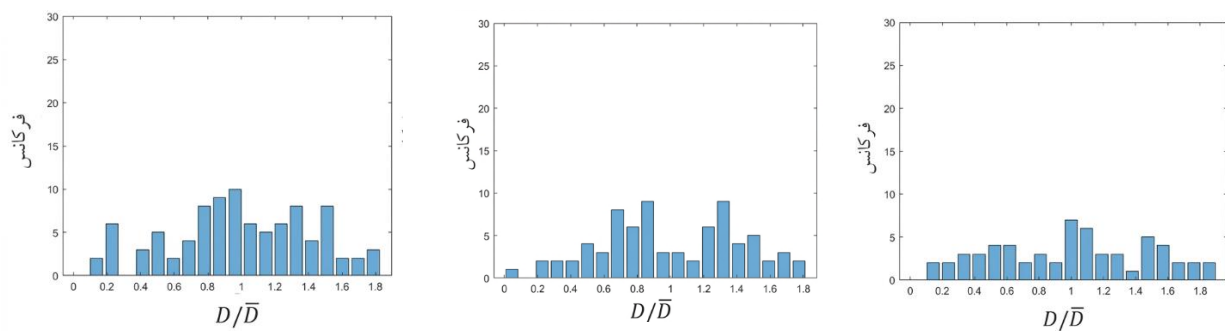
۲۰۰×۲۰۰، ۳۰۰×۳۰۰، ۴۰۰×۴۰۰، ۵۰۰×۵۰۰ و ۶۰۰×۶۰۰ مورد بررسی قرار می‌گیرد. هدف از این تحلیل، ارزیابی اثر اندازه‌ی حجمک نماینده بر پویایی رشد دانه‌ها و بررسی یکنواختی میدان



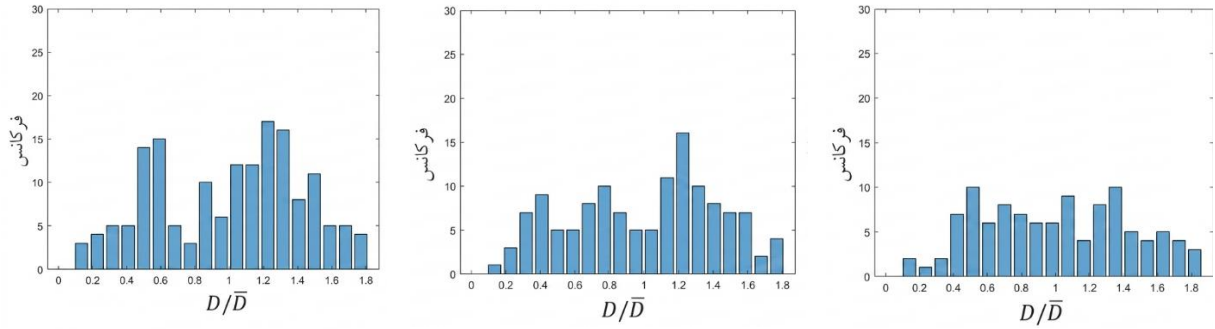
۱۰۰×۱۰۰



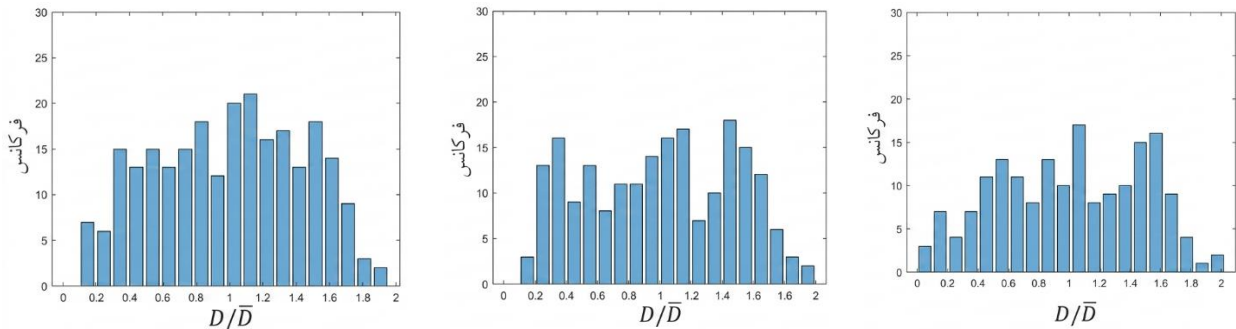
۲۰۰×۲۰۰



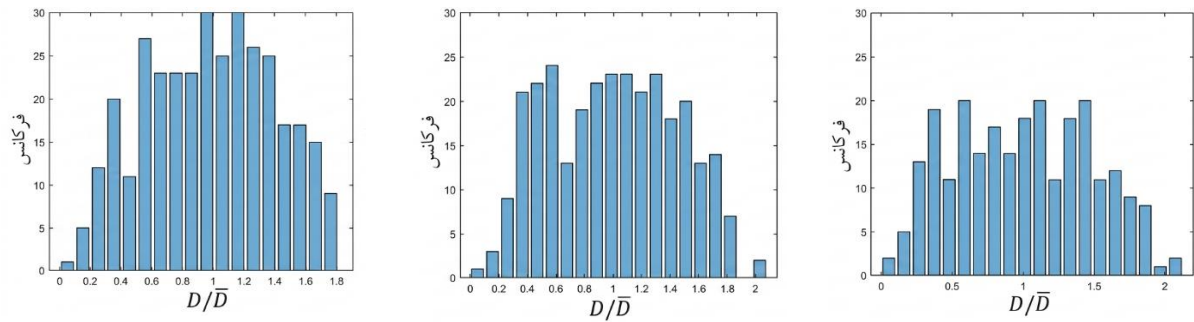
۳۰۰×۳۰۰



۴۰۰×۴۰۰



۵۰۰×۵۰۰



۶۰۰×۶۰۰

شکل ۹. نمودارهای GSD از میکروساختار طی فرآیند آنیلینگ در زمان‌های مختلف  $t = 0.1t_f$ ,  $t = 0.5t_f$ ,  $t = t_f$  برای دامنه‌های

۱۰۰×۱۰۰، ۲۰۰×۲۰۰، ۳۰۰×۳۰۰، ۴۰۰×۴۰۰، ۵۰۰×۵۰۰ و ۶۰۰×۶۰۰.

و نرمال‌سازی بر حسب بیشینه‌ی فراوانی محاسبه می‌شود. شکل ۹ نمودارهای GSD از میکروساختار در طول تکامل مرزدانه‌ها برای سه زمان  $t = 0.1t_f$ ,  $t = 0.5t_f$ ,  $t = t_f$  نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد در طول زمان ارتفاع نمودارها کاهش می‌یابد که ناشی از کاهش تعداد کل دانه‌های میکروساختار است. در

دانه‌ها در همان مرحله است. محاسبه شعاع معادل  $r_i$  هر دانه به صورت معادله (۲۴) تعریف می‌شود:

$$r_i = \sqrt{\frac{A_i}{\pi}} \quad (24)$$

که  $A_i$  مساحت دانه‌ی  $i$ ام است. پس از محاسبه‌ی  $r_i$  برای تمام دانه‌ها، توزیع نرمال‌شده‌ی  $D/\bar{D}$  با استفاده از تقسیم‌بندی بازه‌ای

فازی و کریستال پلاستیسیته استفاده شد. مدل کریستال پلاستیسیته برای محاسبه توزیع انرژی تغییرشکل ذخیره‌شده در دانه‌ها و مدل میدان فازی برای شبیه‌سازی حرکت مرزدانه‌ها در طول فرآیند عملیات حرارتی به‌کار گرفته شد.

در این پژوهش، شبیه‌سازی‌ها برای اندازه‌های مختلف حجمک نماینده از ۱۰ تا ۶۰ میکرومتر انجام شده است. رشد غیرعادی دانه‌ها که ناشی از ناهمگنی‌های انرژی کرنشی است، اهمیت زیادی در کنترل و بهینه‌سازی خواص فیزیکی و مکانیکی مواد دارند. در این مطالعه مشخص شد که اندازه‌های مختلف حجمک نماینده تأثیر مستقیمی بر روی رشد مرزدانه‌ها و تغییرات ریزساختار دارند و نیاز به در نظر گرفتن اندازه بهینه‌ی حجمک نماینده برای فرآیندهای شبیه‌سازی چندمقیاسی است. تحلیل همگرایی نتایج به‌طور واضح نشان داد که ابعاد حدود ۳۰۰ گره یا ۳۰ میکرومتر و بیشتر برای توصیف دقیق رفتار نماینده‌ی ماده در شرایط بارگذاری کششی و شبیه‌سازی‌های ماکروسکوپی مناسب‌ترین انتخاب هستند. این تحلیل می‌تواند راه‌گشای طراحی بهینه حجمک نماینده‌ها در شبیه‌سازی‌های ترمومکانیکی باشد. به‌ویژه این که اندازه‌ی حجمک نماینده باید طوری انتخاب شود که ویژگی‌های رفتاری واقعی ماده در مقیاس‌های مختلف به‌درستی شبیه‌سازی شوند و از نتایج شبیه‌سازی‌های چندمقیاسی و در مقیاس میکروسکوپی بهره‌برداری بهینه صورت گیرد.

دامنه‌های کوچک‌تر مثلاً ۱۰۰×۱۰۰ به دلیل محدودیت‌های آماری، توزیع GSD دارای پراکندگی زیادی است بنابراین برای حجمک نماینده‌های با ابعاد کوچک توزیع دانه‌ها یکنواخت نیست. مقایسه منحنی‌ها و مقدار بیشینه فراوانی نشان داد توزیع اندازه دانه در ابعاد بزرگ‌تر یکنواخت‌تر و از نظر آماری نماینده‌ی دقیق‌تری از رفتار کلی ماده است. بر این اساس، انتخاب دامنه‌ی ۳۰۰×۳۰۰، ۴۰۰×۴۰۰، ۵۰۰×۵۰۰ یا ۶۰۰×۶۰۰ برای مطالعه کمی اثر SIBM در فرآیند عملیات حرارتی به عنوان حجمک نماینده بهینه پیشنهاد می‌شود. همچنین از این نمودارها مشخص است که به خاطر رشد غیرعادی دانه‌ها به خاطر رشد دانه‌های با انرژی بالاتر و مصرف دانه‌هایی با انرژی کمتر نمودار GSD دارای بزرگترین ارتفاع در وسط نیست بلکه ارتفاع GSD هم در دانه‌های کوچک و بزرگ افزایش می‌یابد. بنابراین شکل GSD به شکل کلاسیک منحنی‌های نرمال نیست.

#### ۴. نتیجه‌گیری

مدل‌سازی چندمقیاسی ریزساختار در فلزات چندبلوری به‌منظور تحلیل و پیش‌بینی تغییرات میکروساختاری و خواص ماکروسکوپی مواد از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این تحقیق، به‌منظور بررسی تأثیر اندازه‌ی حجمک نماینده بر سینتیک حرکت مرزدانه‌ها در آلومینیوم، از یک روش کوپل‌شده‌ی میدان

#### واژه‌نامه

- |  |                                  |                                  |
|--|----------------------------------|----------------------------------|
| 1. Multiscale modeling                             | 15. Heat treatment               | 29. Thermo-elastic energy        |
| 2. Microstructure                                  | 16. Thermomechanical process     | 30. Stiffness tensor             |
| 3. Polycrystalline metals                          | 17. Grain growth                 | 31. Shear modulus                |
| 4. Representative Volume Element (RVE)             | 18. Grain boundary energy        | 32. Burger's vector              |
| 5. Material point                                  | 19. Crystallographic orientation | 33. Slip system                  |
| 6. Macroscopic scale                               | 20. Intergranular                | 34. Cauchy stress                |
| 7. Coupled method                                  | 21. Transgranular                | 35. Micro-traction               |
| 8. Phase-field                                     | 22. Annealing                    | 36. Computational homogenization |
| 9. Crystal plasticity                              | 23. Diffuse interface            | 37. UMAT subroutine              |
| 10. Dislocation density                            | 24. Local free energy            | 38. Statistical convergence      |
| 11. Strain Induced grain boundary migration (SIBM) | 25. Plastic energy               | 39. Grain size distribution      |
| 12. Crystal plasticity model                       | 26. Specific heat capacity       | 40. Equivalent radius            |
| 13. Stored deformation energy                      | 27. Reference temperature        |                                  |
| 14. Grain  | 28. Deformation gradient         |                                  |

- Jamshidian M, Thamburaja P, Rabczuk T. A multiscale coupled finite-element and phase-field framework to modeling stressed grain growth in polycrystalline thin films. *Journal of Computational Physics*. 2016;327:779–98. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.09.061>
- Gottstein G, Shvindlerman LS. Grain boundary migration in metals: thermodynamics, kinetics, applications: CRC press; 2009. <https://doi.org/10.1201/9781420054361>
- Tonks M, Millett P. Phase field simulations of elastic deformation-driven grain growth in 2D copper polycrystals. *Materials Science and Engineering: A*. 2011;528(12):4086–91. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.02.007>
- Xie H, Li S, Yang P, Liu C, Jia W, Qin G. Interfacial strain driven nucleation and growth of grain boundary phases. *Acta Materialia*. 2024;263:119486. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119486>
- Bever MB, Holt DL, Titchener AL. The stored energy of cold work. *Progress in materials science*. 1973;17:5–177. [https://doi.org/10.1016/0079-6425\(73\)90001-7](https://doi.org/10.1016/0079-6425(73)90001-7)
- Rosakis P, Rosakis A, Ravichandran G, Hodowany J. A thermodynamic internal variable model for the partition of plastic work into heat and stored energy in metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2000;48(3):581–607. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(99\)00048-4](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(99)00048-4)
- Benzerga A, Bréchet Y, Needleman A, Van der Giessen E. The stored energy of cold work: Predictions from discrete dislocation plasticity. *Acta Materialia*. 2005;53(18):4765–79. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.07.011>
- Stojakovic D, Doherty R. D, Kalidindi S. R, Landgraf F. J. Thermomechanical processing for recovery of desired {001} fiber texture in electric motor steels. *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2008;39: 1738–1746. <https://doi.org/10.1007/s11661-008-9525-2>
- Taleff E. M, Pedrazas N. A. A new route for growing large grains in metals. *Science*. 2013; 341: 1461–1462. <https://doi.org/10.1126/science.1245056>
- Kashihara, Konishi H, Shibayanagi T. Strain-induced grain boundary migration in  $\{1\ 1\ 2\} < 111 > / \{1\ 0\ 0\} < 001 >$  and  $\{1\ 2\ 3\} < 634 > / \{1\ 0\ 0\} < 001 >$  aluminum bicrystals. *Materials Science and Engineering: A*. 2011; 528: 8443– 8450. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.08.020>
- Ciulik J, Taleff E. M. Dynamic abnormal grain growth: A new method to produce single crystals. *Scripta Mater*. 2009; 61: 895–898. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2009.07.021>
- Zhao P, Low TSE, Wang Y, Niezgoda SR. An integrated full-field model of concurrent plastic deformation and microstructure evolution: application to 3D simulation of dynamic recrystallization in polycrystalline copper. *International Journal of Plasticity*. 2016;80:38–55. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.12.010>
- Jafari M, Jamshidian M, Ziaei-Rad S, Raabe D, Roters F. Constitutive modeling of strain induced grain boundary migration via coupling crystal plasticity and phase-field methods. *International Journal of Plasticity*. 2017;99:19–42. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2017.08.004>
- Jafari M, Jamshidian M, Ziaei-Rad S, Lee B. Modeling length scale effects on strain induced grain boundary migration via bridging phase field and crystal plasticity methods. *International Journal of Solids and Structures*. 2019;174:38–52. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2019.06.003>
- Kai L, Yao S, Ding T, Da-yong L. Simulation of strain induced abnormal grain growth in aluminum alloy by coupling crystal plasticity and phase field methods. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2022;32(12):3873–86. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(22\)66064-3](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(22)66064-3)
- Auth KL, Brouzoulis J, Ekh M. Gradient-enhanced crystal plasticity coupled with phase-field fracture modeling. arXiv preprint arXiv:240211605. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2024.105418>
- Varshabi N, Jafari M, Jamshidian M, Silani M, Thamburaja P, Rabczuk T. Phase-Field Modeling of Stressed Grain Growth in Nanocrystalline Metals. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2025:110951. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2025.110951>
- Chatterjee R, Trivedi A, Narayana Murthy S.V.S, Alankar A. Crystal plasticity-phase-field-based analyses of interfacial microstructural evolution during dynamic recrystallization in a dual phase titanium alloy. *International Journal of Plasticity*. 2024; 181:1-33. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2024.104087>
- Tran A, Wildey T, Lim H. Microstructure-sensitive uncertainty quantification for crystal plasticity finite element constitutive models using stochastic collocation methods. *Frontiers in Materials*. 2022;9:915254. <https://doi.org/10.3389/fmats.2022.915254>
- Jafari M, Jamshidian M, Ziaei-Rad S. A finite-deformation dislocation density-based crystal viscoplasticity constitutive model for calculating the stored deformation energy. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2017;128:486–98. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.05.016>

21. Thamburaja P, Jamshidian M. A multiscale Taylor model-based constitutive theory describing grain growth in polycrystalline cubic metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2014;63:1–28. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2013.10.009>
22. Zhao L, Chakraborty P, Tonks M, SzuLufarska I. On the plastic driving force of grain boundary migration: A fully coupled phase field and crystal plasticity model. *Computational Materials Science*. 2017;128:320–30. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.11.044>
23. Anand L, Gurtin ME, Reddy BD. The stored energy of cold work, thermal annealing, and other thermodynamic issues in single crystal plasticity at small length scales. *International Journal of Plasticity*. 2015;64:1–25. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2014.07.009>
24. Abrivard G, Busso E.P, Forest S, Appolaire B. Phase field modelling of grain boundary motion driven by curvature and stored energy gradients. Part I: theory and numerical implementation. *Philosophical magazine*. 2012; 92:28-30. <https://doi.org/10.1080/14786435.2012.717726>
25. Fried E, Gurtin ME. Dynamic solid-solid transitions with phase characterized by an order parameter. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1994;72(4):287–308. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(94\)90234-8](https://doi.org/10.1016/0167-2789(94)90234-8)
26. Lee M, Lim H, Adams B, Hirth J, Wagoner R. A dislocation density-based single crystal constitutive equation. *International Journal of Plasticity*. 2010;26(7):925–38. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2009.11.004>
27. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Comput Methods Appl Mech Eng*. 2004;193:5359–83 . *Advances in Computational Plasticity*. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.068>
28. Steinbach I, Pezzolla F. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1999; 134(4): 385–93. [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(99\)00129-3](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(99)00129-3)
29. Taylor GI. Plastic strain in metals. *J Inst Metals*. 1938;62:307–24. <https://cir.nii.ac.jp/crid/1571135650487126144>